

# SÉMINAIRE ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES – ÉCOLE POLYTECHNIQUE

B. HELFFER

J. SJÖSTRAND

**Opérateurs de Schrödinger avec champs magnétiques faibles et constants**

*Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)* (1988-1989), exp. n° 12,  
p. 1-11

[http://www.numdam.org/item?id=SEDP\\_1988-1989\\_\\_\\_A12\\_0](http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1988-1989___A12_0)

© Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique)  
(École Polytechnique), 1988-1989, tous droits réservés.

L'accès aux archives du séminaire Équations aux dérivées partielles (<http://sedp.cedram.org>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme  
Numérisation de documents anciens mathématiques  
<http://www.numdam.org/>

*CENTRE  
DE  
MATHEMATIQUES*

Unité de Recherche Associée D 0169

ECOLE POLYTECHNIQUE

F-91128 PALAISEAU Cedex (France)

Tél. (1) 69.41.82.00

Télex ECOLEX 601.596 F

Séminaire 1988-1989

---

## ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES

OPERATEURS DE SCHRÖDINGER AVEC CHAMPS  
MAGNETIQUES FAIBLES ET CONSTANTS

B. HELFFER et J. SJÖSTRAND



***Opérateurs de Schrödinger avec champs magnétiques faibles et constants.***

	par	
B. Helffer,	et	J. Sjöstrand
Dépt. de Mathématiques		Dépt. de Mathématiques, Bat. 425
Université de Nantes		Université de Paris Sud
2, Chemin de la Houssinière		F-91405 Orsay, FRANCE
F-44072 Nantes, FRANCE		et: URACNRS D0760
et: URA CNRS 758		

Le but de cet exposé est de décrire un traitement mathématique de la substitution de Peierls et de l'effet de de Haas-van Alphen. A part des travaux classiques de Peierls [P] et de Onsager [O], nous avons été inspirés par plusieurs travaux mathématiques, tels que: Avron-Simon [ASi], Nenciu [N1-3], Bellissard [B1,2], Guillot-Ralston-Trubowitz [GuRT]. (On donnera aussi quelques références à la littérature physique.) Nous avons appris l'utilité des fonctions de Wannier dans [B1,2],[N1-3], et dans notre travail précédent, [HS1], nous avons utilisé de telles fonctions dans le cas où l'opérateur de Schrödinger périodique (avec champ magnétique zero) admet une bande simple dans son spectre. Dans ce cas, nous obtenons une réduction de l'étude du spectre et de la densité d'états à celle des quantités correspondantes pour un certain Hamiltonien effectif, qui est un opérateur pseudodifférentiel "obtenu par la substitution de Peierls". Dans [B1,2],[N1-3] des réductions à une matrice infinie étaient données, et de telles réductions jouent un rôle comme étape intermédiaire dans notre approche. Dans [GuRT] on trouve des constructions de certaines solutions approchées (BKW) de l'équation de Schrödinger magnétique avec l'effet de de Haas-van Alphen comme motivation, ainsi que quelques résultats partiels concernant le spectre. Dans ce travail on voit bien apparaître les valeurs propres du problème de Floquet avec champ 0.

Plus récemment nous avons réussi à éliminer l'hypothèse de "bande simple". Les fonctions de Wannier habituelles disparaissent alors, mais subsistent sous une forme modifiée dans le choix de certains opérateurs auxiliaires. Dans cet exposé on se place dans ce cadre plus général. Voir [HS2] pour plus de détails.

Soit  $V \in C^\infty(\mathbb{R}^n; \mathbb{R})$   $\Gamma$ -périodique, où  $\Gamma = \bigoplus_1^n \mathbb{Z}e_j$ , et les  $e_j$  forment une base de  $\mathbb{R}^n$ :  $V(x+\gamma) = V(x)$  pour tout  $\gamma \in \Gamma$ . Soient  $A_1, \dots, A_n \in C^\infty(\mathbb{R}^n; \mathbb{R})$ , et supposons que le "champ magnétique",

$B = d(\sum A_j dx_j)$  soit constant sur  $\mathbb{R}^n$ . On s'intéresse alors au spectre et à la densité d'états pour l'opérateur de Schrödinger magnétique (l'o.S.m):

$$(1) \quad P_{B,V} = \sum (D_{x_j} + A_j(x))^2 + V(x).$$

Par conjugaisons par des facteurs exponentielles, on voit immédiatement que si  $B$  est donnée, des choix différents de  $A$  mènent à des opérateurs unitairement équivalents. Comme on suppose que  $B = \frac{1}{2} \sum b_{j,k} dx_j \wedge dx_k$ , avec  $b_{j,k} = -b_{k,j}$  constant, on peut prendre  $A_k(x) = \frac{1}{2} \sum b_{j,k} x_j$ .

Dans le cas  $B=0$  on peut employer la théorie de Bloch-Floquet: Soit  $\Gamma^* = \{\gamma^* \in \mathbb{R}^{n*}; \gamma \gamma^* \in 2\pi\mathbb{Z}\}$  le réseau dual, et posons  $\mathfrak{H}_\theta = \{u \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^n); u(x+\gamma) = e^{i\gamma \theta} u(x) \text{ pour tous } \gamma \in \Gamma\}$ , où  $\theta \in \mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*$  (ce qui est un espace de Hilbert muni du produit scalaire  $L^2$  standard sur un domaine fondamental de  $\Gamma$ ). L'opérateur  $U$ , défini par:  $Uu(x, \theta) = \sum_{\Gamma} u(x-\gamma) e^{i\gamma \theta}$  est unitaire de

$L^2(\mathbb{R}^n)$  sur  $\int^\oplus \mathfrak{H}_\theta d\theta$  et l'inverse est donné par

$$U^{-1}v(x) = (\text{Vol}(\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*))^{-1} \int v(x, \theta) d\theta.$$

$P = P_{0,V}$  est alors unitairement équivalent à  $\int^\oplus P_\theta d\theta$ , où  $P_\theta$  est l'opérateur essentiellement autoadjoint, obtenu en faisant agir  $P_{0,V}$  au sens des distributions sur  $\mathfrak{H}_\theta$ . On sait aussi que le spectre

de  $P_{0,V}$  est purement absolument continu et de la forme  $\bigcup_0^\infty J_k$ , où

$J_k = \{E_k(\theta); \theta \in \mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*\}$ . Ici  $E_0(\theta) \leq E_1(\theta) \leq \dots$  sont les valeurs propres de  $P_\theta$ .

Dans le cas d'une bande simple:  $J_{k_0}$ , (disjoint de  $J_k$  quand  $k \neq k_0$ ) la substitution de Peierls dit que si  $B$  est petit et pour des énergies proches de  $J_{k_0}$ , l'o.S.m. est "bien approché" par l'opérateur pseudodifférentiel:  $E_{k_0}(D_{x_1} + A_1(x), \dots, D_{x_n} + A_n(x))$ .

On fixe maintenant  $z_0 \in \mathbb{R}$ . On veut étudier le spectre et la densité d'états près de l'énergie  $z_0$ , quand  $B$  est petit. On commence par le cas  $B=0$ :

*Proposition 1.* Il existe un entier  $N \geq 0$ , et des fonctions analytiques,  $\varphi_j: \mathbb{R}^{n*}/\Gamma^* \rightarrow \mathfrak{H}_\theta$ , pour  $j=1, \dots, N$ , tels que pour tout  $\theta \in \mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*$  et pour tout  $z$  dans un voisinage complexe de  $z_0$ , l'opérateur

$$\mathfrak{P}(z, \theta) = \begin{pmatrix} P_\theta - z & R_- \\ R_+ & 0 \end{pmatrix} : \mathfrak{H}_\theta^2 \times \mathbb{C}^N \rightarrow \mathfrak{H}_\theta \times \mathbb{C}^N$$

est bijectif. Ici  $\mathfrak{H}_\theta^2 = \mathfrak{H}_\theta \cap H^2_{loc}(\mathbb{R}^n)$ , et  $R_\pm$  sont définis par  $R_+ u(j) = (u | \varphi_j)_{\mathfrak{H}_\theta}$ ,  $R_- = R_+^*$ .

Si  $z_0$  appartient à une bande simple,  $J_{k_0}$ , alors on peut prouver que  $\text{Ker}(P_\theta - E_{k_0}(\theta))$  est un fibré trivial sur  $\mathbb{R}^{n^*}/\Gamma^*$  (Voir [N1],[HS1]), et il en résulte que l'on peut prendre  $N=1$ , et  $\psi_1(\theta) = \psi(\theta) \in \text{Ker}(P_\theta - E_{k_0}(\theta))$  avec  $\|\psi\| = 1$ .

Soit

$$\mathfrak{E}(z, \theta) = \begin{pmatrix} E(z, \theta) & E_+(z, \theta) \\ E_-(z, \theta) & E_{-+}(z, \theta) \end{pmatrix}$$

l'inverse de  $\mathfrak{P}(z, \theta)$ . (Dans le cas d'une bande simple on obtient  $E_{-+}(z, \theta) = z - E_{k_0}(\theta)$ , avec le choix de  $R_\pm$  que l'on vient d'indiquer.)

Observons que  $z$  appartient au spectre de  $P_\theta$ ,  $\sigma(P_\theta)$  si et seulement si  $0$  appartient au spectre de  $E_{-+}(z, \theta)$ . Ceci résulte des formules:

$$(P_\theta - z)^{-1} = E(z, \theta) - E_+(z, \theta)(E_{-+}(z, \theta))^{-1}E_-(z, \theta),$$

$$E_{-+}(z, \theta)^{-1} = -R_+(P_\theta - z)^{-1}R_-.$$

Rajoutons maintenant un champ magnétique constant,  $B$ . Pour un  $m$  convenable, soient  $l_1(x, \xi), \dots, l_n(x, \xi)$  des formes linéaires et indépendantes sur  $T^*\mathbb{R}^m = \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^{m^*}$  telles que,

$$(2) \quad \{l_j, l_k\} = \langle B, e_j \wedge e_k \rangle, \text{ for } j, k = 1, \dots, n.$$

Ici  $\{a, b\}$  désigne le crochet de Poisson:  $\sum(\partial_{\xi_j} a)(\partial_{x_j} b) - (\partial_{x_j} a)(\partial_{\xi_j} b)$ , pour  $a = a(x, \xi)$ ,  $b = b(x, \xi)$  dans  $C^\infty(T^*\mathbb{R}^m)$ . Par exemple, on peut toujours prendre  $m=n$  et  $l_j(x, \xi) = \xi_j + A_j(x)$  (ce qui correspond à la substitution de Peierls classique). Parfois on peut aussi avoir  $m < n$ . (Ainsi l'opérateur de Harper correspond aux choix  $m=1$  quand  $n=2$ , dans un contexte légèrement différent.)

Soit  $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_n)$ , où  $\theta_j = \langle \theta, e_j \rangle$ , et pour ces coordonnées (duales) sur  $\mathbb{R}^{n^*}$ , définissons  $l(x, \xi) = (l_1(x, \xi), \dots, l_n(x, \xi))$  comme un point de  $\mathbb{R}^{n^*}$ .

Observons que  $\langle B, e \wedge f \rangle = \{\langle e, l(\cdot) \rangle, \langle f, l(\cdot) \rangle\}$  pour tous  $e, f \in \mathbb{R}^n$ . Nous avons alors:

**Théoreme 2.** Il existe une fonction  $C^\infty$ ,  $g = g(B, z; \theta)$  à valeurs dans les matrices  $N \times N$ , définie dans un voisinage de  $\{0\} \times \{z_0\} \times (\mathbb{R}^{n^*}/\Gamma^*)$  dans  $\mathbb{R}^{n(n-1)/2} \times \mathbb{C} \times (\mathbb{C}^{n^*}/\Gamma^*)$ , holomorphe en  $z, \theta$ , telle que pour  $z, B$  dans un voisinage de  $(z_0, 0)$  dans  $\mathbb{C} \times \mathbb{R}^{n(n-1)/2}$ , nous avons l'équivalence:

$$(3) \quad z \in \sigma(P_{B, \psi}) \Leftrightarrow 0 \in \sigma(\text{Op}^W(g(B, z; l(x, \xi)))).$$

De plus,  $g(0, z; \theta) = E_{-+}(z, \theta)$ .

Ici " $\sigma$ " = "spectre de", et si  $a$  appartient à une classe convenable de symboles sur  $T^*\mathbb{R}^m$ ,  $\text{Op}^W(a)$  désigne la quantification de Weyl:

(4)  $Op^W(a)u(x) = \iint e^{i(x-y)\eta} a((x+y)/2, \eta) u(y) dy d\eta / (2\pi)^m, u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ .  
 Nous désignerons souvent par la même lettre, le symbole et son quantifié de Weyl.

*Esquisse de la démonstration.* On retourne d'abord au cas  $B=0$ , et on pose  $\Phi_{0,j}(x) = U^{-1}(\psi_j)(x)$ ,  $\Phi_{\gamma,j}(x) = \Phi_{0,j}(x-\gamma)$ . Dans le cas d'une bande simple, et avec les choix indiqués après la Proposition 1, les fonctions  $\Phi_{\gamma} = \Phi_{\gamma,1}$  forment une base orthonormale du sous-espace spectral associé à  $P_{0,V}$ ,  $J_{k_0}$ . Ce sont les fonctions de Wannier, utilisées par Bellissard [B1,2] et Nenciu [N1-3]. Dans le cas général, l'analyticité de  $\psi_j$  par rapport à  $\theta$ , entraîne que  $\Phi_{0,j}$  est à décroissance exponentielle: Il existe une constante  $C > 0$  telle que,  $|\Phi_{0,j}(x)| \leq Ce^{-|x|/C}$  pour tous  $x \in \mathbb{R}^n$ , et nous avons le même type d'estimation pour chaque dérivée de  $\Phi_{0,j}$ . (En effet, on utilise ici une version légèrement renforcée de la Proposition 1, à savoir que l'on peut choisir les  $\psi_j \in C^\infty$  en  $x$ .)

Utilisant  $U^{-1}$ , on trouve que

$$\mathcal{P}^0(z) = \begin{pmatrix} P_{0,V} - z & R_+^0 \\ R_+^0 & 0 \end{pmatrix} : \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^n) \times \mathcal{L}^2(\Gamma; \mathbb{C}^N) \rightarrow \mathcal{L}^2 \times \mathcal{L}^2,$$

est bijectif, où  $(R_+^0 u)(\gamma)_j = (u | \Phi_{\gamma,j})_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)}$ , et  $R_-^0 = (R_+^0)^*$  (=l'adjoint complexe de  $R_+^0$ ). Si

$$\mathcal{E}^0(z) = \begin{pmatrix} E^0(z) & E_+^0(z) \\ E_-^0(z) & E_{-+}^0(z) \end{pmatrix}$$

désigne l'inverse, alors  $E_{-+}^0(z)$  est donné par la matrice (de blocs),  $E_{-+}^0(z; \alpha, \beta) = \mathcal{F}(E_{-+}^0(z, \cdot))(\beta - \alpha)$ , où  $\mathcal{F}(f)(\alpha)$  désigne le coefficient de Fourier en  $\alpha \in \Gamma$ , de la fonction  $f \in C^\infty(\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*)$ . Grâce à la décroissance exponentielle de la fonction  $\Phi_{0,j}$ , on peut montrer que  $\mathcal{E}^0(z)$  reste borné aussi dans certains espaces à poids exponentiels.

Si  $B \neq 0$ , on doit considérer  $P_{B,V}$  comme une perturbation singulière de  $P_{0,V}$ . En plus,  $P_{B,V}$  ne commute pas en général avec les translations par les éléments de  $\Gamma$ . On utilise alors des translations "magnétiques" (Voir Zak [Z], Luttinger [L], Bellissard [B1,2] et Nenciu [N1-3]): Pour  $\alpha \in \Gamma$ , on pose  $T_\alpha^B u(x) = e^{(i/2)\langle B, x \wedge \alpha \rangle} u(x - \alpha)$  et on vérifie que:

(4)  $[P_{B,V}, T_\alpha^B] = 0$ .

On ne peut pas utiliser la théorie de Floquet (en général) car les  $T_\alpha^B$  ne commutent pas (en général) entre eux:

$$(5) \quad T_{\alpha}^B T_{\beta}^B = e^{-i\langle B, \alpha \wedge \beta \rangle} T_{\beta}^B T_{\alpha}^B.$$

On pose  $\Phi_{\alpha, j}^B = T_{\alpha}^B \Phi_{0, j}$ .  $R_{\mp}^B u(\alpha)_j = (u | \Phi_{\alpha, j}^B)$ ,  $u \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ,  $R_{-}^B = R_{\mp}^{B*}$ ,

$$\mathfrak{P}^B(z) = \begin{pmatrix} P_{B, \vee - z} & R_{-}^B \\ R_{\mp}^B & 0 \end{pmatrix}.$$

Soit  $H_B^2 = \{u \in L^2(\mathbb{R}^n); (D_{x_j} + A_j)u, (D_{x_j} + A_j)(D_{x_k} + A_k)u \in L^2 \text{ pour tous } j, k\}$ .

C'est un espace de Hilbert.

*Proposition 3.* Pour  $(z, B)$  dans un voisinage de  $\{z_0\} \times \{0\}$  dans  $\mathbb{C} \times \mathbb{R}^{n(n-1)/2}$ , l'opérateur  $\mathfrak{P}_B(z)$  est bijectif:  $H_B^2 \times \mathbb{C}^2 \rightarrow L^2 \times \mathbb{C}^2$ . Si

$$\mathfrak{E}^B(z) = \begin{pmatrix} E^B(z) & E_{\mp}^B(z) \\ E_{-}^B(z) & E_{+}^B(z) \end{pmatrix}$$

désigne l'inverse correspondant, alors la matrice de  $E_{+}^B(z)$  est de la

forme,  $E_{+}^B(z) = e^{(i/2)\langle B, \alpha \wedge \beta \rangle} f(B, z; \alpha - \beta)$ , où  $f$  est  $C^\infty$  en  $B, z$  et

holomorphe en  $z$ , avec

$$(6) \quad |\partial_{\bar{z}}^{\gamma} f(B, z; \alpha)| \leq C_{\gamma} e^{-\eta|\alpha|} \text{ pour un } \eta > 0 \text{ convenable, indépendant de } \gamma,$$

$$(7) \quad f(0, z; \alpha) = \mathfrak{F}(E_{-+}(z, \cdot))(-\alpha).$$

De plus,  $z \in \sigma(P_{B, \vee})$  si et seulement si  $0 \in \sigma(E_{+}^B(z))$ .

L'idée est d'utiliser que  $P_{B, \vee}$  est proche de  $P_{0, \vee}$ , dans tout compact fixé quand  $B$  est assez petit. La même chose vaut pour  $\mathfrak{P}^B$  et  $\mathfrak{P}^0$  et il se trouve, que l'on obtient des inverses approchés en utilisant des partitions de l'unité convenables, les translations magnétiques et  $\mathfrak{E}^0$ .

Les matrices de la forme  $\mathfrak{M}_B(f)(\alpha, \beta) = e^{(i/2)\langle B, \alpha \wedge \beta \rangle} f(\alpha - \beta)$  avec  $f \in \mathcal{L}^1(\Gamma)$  forment une algèbre. Nous pouvons écrire  $\mathfrak{M}_B(f) = \sum f(\alpha) \tau_{\alpha}^{-B}$ ,

$\tau_{\alpha}^{-B} = \mathfrak{M}_B(\delta_{\alpha})$  où  $\delta_{\alpha}(\beta) = 1$  si  $\beta = \alpha$ , et  $= 0$  sinon. Nous avons,

$$(8) \quad \tau_{\alpha}^{-B} \tau_{\beta}^{-B} = e^{i\langle B, \alpha \wedge \beta \rangle} \tau_{\beta}^{-B} \tau_{\alpha}^{-B}.$$

Grace au choix des  $l_j$ , on vérifie que,

$$(9) \quad e^{i\langle \alpha, l(x, D_x) \rangle} e^{i\langle \beta, l(x, D_x) \rangle} = e^{i\langle B, \alpha \wedge \beta \rangle} e^{i\langle \beta, l(x, D_x) \rangle} e^{i\langle \alpha, l(x, D_x) \rangle}.$$

En fait,  $e^{i\langle \alpha, l(x, D_x) \rangle} = \text{Op}^W(e^{i\langle \alpha, l(x, \xi) \rangle})$  et nous pouvons utiliser le calcul de Weyl des opérateurs pseudodifférentiels. (Voir [BoGH], [Hö].) A

$\mathfrak{M}_B(f)$  nous pouvons alors associer l'opérateur pseudodifférentiel,

$\text{Op}^W(\sum f(\alpha) e^{i\langle \alpha, l(x, \xi) \rangle}) = \text{Op}^W(g \circ l)$ , où  $g$  est la fonction sur  $\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*$  donnée par  $f = \mathfrak{F}(g)$ . cette correspondance commute avec la composition des opérateurs.



Dans le cas où  $f$  est à décroissance exponentielle, on peut montrer à l'aide d'un théorème de R. Beals [Be], que

$$(10) \quad \sigma(\mathfrak{M}_B(f)) = \sigma(\text{Op}(g \circ l)).$$

Appliquant ceci à la fonction,  $f$ , donnée dans la Proposition 3, nous obtenons le Théorème 2.

*Remarque 4.* Si on veut appliquer de l'analyse semiclassique, on peut fixer un champ  $B$ , et considérer  $hB$  avec  $h \rightarrow 0$ . Si  $l_1, \dots, l_n$  sont adaptés à  $B$  alors nous pouvons associer à  $hB$  les formes linéaires  $l_j(x, h\xi)$ , et l'étude du spectre de  $P_{hB, \nu}$  est alors réduite à celle du spectre de l'opérateur "semiclassique":  $\text{Op}^W(g(hB, z; l(x, h\xi)))$ .

Les mêmes réductions s'appliquent à la densité d'états. Soit  $F \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ . Alors  $F(P_{B, \nu})$  est un opérateur régularisant; le noyau distribution,  $K(x, y)$  est de classe  $C^\infty$  et vérifie:  $K(x+\gamma, x+\gamma) = K(x, x)$  pour tous  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $\gamma \in \Gamma$ .

Suivant Shubin [Sh], et d'autres auteurs, nous introduisons la "trace moyenne",

$$(11) \quad \tilde{\text{tr}} F(P_{B, \nu}) = \int_{\Omega} K(x, x) dx / \text{Vol}(\Omega),$$

où  $\Omega$  est un domaine fondamental de  $\Gamma$ . Si  $F \geq 0$ , alors  $\tilde{\text{tr}} F(P_{B, \nu}) \geq 0$ , et il existe donc une mesure de Radon unique  $\rho_{B, \nu}$  ("la densité d'états") telle que,

$$(12) \quad \tilde{\text{tr}} F(P_{B, \nu}) = \int F(z) \rho_{B, \nu}(dz).$$

Soit  $\tilde{F} \in C_0^\infty(\mathbb{C})$  une extension de  $F$  telle que  $\bar{\partial}\tilde{F} = \mathcal{O}(|\text{Im}(z)|)$ . Alors,

$$(13) \quad F(P_{B, \nu}) = -(1/\pi) \int \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} (z - P_{B, \nu})^{-1} L(dz),$$

où  $L$  désigne la mesure de Lebesgue sur  $\mathbb{C} \simeq \mathbb{R}^2$ . Si  $F$  et  $\tilde{F}$  ont leur support dans un voisinage suffisamment petit de  $z_0$ , nous pouvons appliquer la formule,  $(z - P_{B, \nu})^{-1} = -E^B(z) + E_+^B(z)(E_-^B(z))^{-1}E_-^B(z)$ , et le fait que  $E^B(z)$  est holomorphe in  $z$ , pour obtenir,

$$(14) \quad F(P_{B, \nu}) = -(1/\pi) \int \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} E_+^B(z)(E_-^B(z))^{-1}E_-^B(z) L(dz).$$

Ensuite nous prenons la trace de cette relation. On peut montrer que,

$$(15) \quad \tilde{\text{tr}} E_+^B(E_-^B(z))^{-1}E_-^B = \hat{\text{tr}}(E_-^B E_+^B (E_-^B)^{-1}),$$

où,

$$(16) \quad \hat{\text{tr}}(\mathfrak{M}_B(f)) = (\text{Vol}(\Omega))^{-1} \text{tr}(f(0)) = (2\pi)^{-n} \int_{\mathbb{R}^{n^*}/\Gamma^*} \text{tr} g(\theta) d\theta, \quad f = \mathfrak{F}g.$$

De plus,

$$(17) \quad E_B E_B^+ = \partial E_B^+ / \partial z.$$

Si  $Q = \text{Op}^W(g \circ l)$  est l'opérateur introduit dans le Théorème 2, nous obtenons:

$$(18) \quad \tilde{\text{tr}} F(P_B, \nu) = -(1/\pi) \int \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}} \tilde{\text{tr}}((\partial Q / \partial z) \circ Q^{-1}) L(dz) / \text{Vol}(\Omega)$$

Ici, dans le cas des quantifications de Weyl, nous définissons  $\tilde{\text{tr}}(\text{Op}^W(q))$  comme la valeur moyenne de la trace du symbole  $q$ . (Cette valeur moyenne existe dans le cas de  $(\partial Q / \partial z) \circ Q^{-1}$ ).

On peut voir  $l(x, \xi) = (l_1(x, \xi), \dots, l_n(x, \xi))$  comme une application linéaire surjective:  $T^*\mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{n^*}$ , avec la propriété:

$$(19) \quad \langle \langle e, l(\cdot) \rangle \rangle, \langle \langle f, l(\cdot) \rangle \rangle \rangle = \langle B, e \wedge f \rangle, \quad \text{pour tous } e, f \in \mathbb{R}^n.$$

Les fonctions  $l_j$  décrivent alors  $l(x, \xi)$  dans les coordonnées duales sur  $\mathbb{R}^{n^*}$ :  $\theta_j = \langle e_j, \theta \rangle$ .

Si  $n$  est pair et  $B$  est de rang maximal, on peut choisir une base  $f_1, \dots, f_n$  de  $\mathbb{R}^n$  (qui n'a plus rien à avoir avec le réseau  $\Gamma$ ), telle que pour les coordonnées correspondantes:

$$B = \sum_1^{n/2} dy_{j+n/2} \wedge dy_j$$

Si on change les  $l_j$  en  $l_j = \langle f_j, l \rangle$ , on constate que les  $x_j = l_j$ ,  $\xi_j = l_{j+n/2}$ ,  $1 \leq j \leq \frac{1}{2}n$  forment un système partiel de coordonnées symplectiques sur  $T^*\mathbb{R}^m$ . Avec  $B$  remplacé par  $hB$ ,  $Q$  prend la forme:

$$(20) \quad Q = \tilde{Q}(h, z, x'', h\xi''), \quad \text{où } (x'', \xi'') = (x_1, \dots, x_{\frac{1}{2}n}, \xi_1, \dots, \xi_{\frac{1}{2}n}).$$

Ici on identifie les opérateurs et leurs symboles de Weyl, et  $\tilde{Q}(h, z, \theta)$  est la fonction  $g(hB, z, \theta)$  exprimée dans les coordonnées duales,  $\theta_j = \langle e_j, \theta \rangle$ .

Si  $n = 2n' + 1$  est impair et de rang maximal, on peut choisir la base  $(f_1, \dots, f_n)$  telle que

$$B = \sum_1^{n'} dy_{n'+j} \wedge dy_j$$

Toujours avec  $l_j = \langle e_j, l \rangle$ , on obtient un système partiel de coordonnées symplectiques sur  $T^*\mathbb{R}^m$ , en posant  $x_j = l_j$ ,  $\xi_j = l_{n'+j}$ ,  $1 \leq j \leq n'$ ,  $x_{n'+1} = l_n$ , et remplaçant  $B$  par  $hB$ ,  $Q$  devient:

$$(21) \quad Q = \tilde{Q}(h, z; x'', h\xi'', x_{n'+1}), (x'', \xi'') = (x_1, \dots, x_{n'}, \xi_1, \dots, \xi_{n'}).$$

Ici  $x_{n'+1}$  est un paramètre. Ecrivons  $Op_h(a(x, \xi)) = Op^W(a(x, h\xi))$ , et disons que  $a$  est le symbole de l'opérateur  $h$ -pseudodifférentiel. Soit  $a \#_h b$  le symbole de l'op.  $h$ -pseudodiff.  $Op_h(a) \circ Op_h(b)$ . Si  $\chi \in L^\infty(\mathbb{R}^{n*})$  est à support compact avec la propriété:  $\sum_{\alpha \in \Gamma} \chi(\theta - \alpha) = 1$ , on obtient la formule:

$$(22) \quad \tilde{\text{tr}} F(P_{hB}, \nu) = \frac{\iiint \chi(\partial_z \tilde{F}(z)) \text{tr}[\partial_z \tilde{Q}(h, z; x'', \xi'', t) \#_h \tilde{Q}^{-1}(h, z; x'', \xi'', t)] L(dz) dx'' d\xi'' dt}{\pi \text{Vol}(\mathbb{R}^n / \Gamma) \iint \chi dx'' d\xi'' dt}.$$

Ici, on identifie les opérateurs  $h$ -pseudodiff. avec leur symboles, et en particulier,  $\tilde{Q}^{-1}$  désigne le  $h$ -symbole de l'inverse de  $Op_h(\tilde{Q})$ .

L'opération  $\#_h$  ne concerne que les variables  $x'', \xi''$ , et dans le cas  $n=3$ , on est donc ramené à la composition d'opérateurs pseudodifférentiels en dimension 1. Dans ce cas,  $B$  est de rang maximal, dès que  $B \neq 0$ . Les plans  $t = \text{Const.}$  s'identifient alors avec les translatés de  $(\text{Ker} B)^\perp$ .

On supposera désormais que  $n=3$ , et dans ce cas on va étudier la mesure de densité d'états et mettre en évidence un comportement étroitement lié à l'effet de de Haas - van Alphen en physique des solides. (Une explication heuristique de ce phénomène fut donnée par Onsager [0], voir aussi [AsM].) Avec  $z_0 \in \mathbb{R}$  fixé comme avant, on introduit la surface de Fermi:

$$(23) \quad \mathfrak{F}(z_0) = \{\theta \in \mathbb{R}^{3*} : z_0 \in \sigma(P_\theta)\}.$$

On suppose:

(H1) Pour tout  $\theta \in \mathfrak{F}(z_0)$ ,  $z_0$  est une valeur propre simple de  $P_\theta$ .

Pour  $\theta_0$  dans un voisinage convenable de  $\mathfrak{F}(z_0)$ , on désigne par  $\lambda(\theta)$  la valeur propre de  $P_\theta$ , qui dépend analytiquement de  $\theta$  et qui vaut  $z_0$  sur  $\mathfrak{F}(z_0)$ . La deuxième hypothèse est alors que:

$$(H2) \quad d\lambda(\theta) \neq 0 \text{ pour tout } \theta \in \mathfrak{F}(z_0).$$

On fixe maintenant un  $B \neq 0$  (bien que toute la discussion soit uniformément valable, si  $B$  varie dans un petit voisinage d'un  $B_0 \neq 0$ ). Soit  $\mathfrak{K} = (\text{Ker} B)^\perp \subset \mathbb{R}^{3*}$ . On suppose:

(H3) Si  $\theta_0 \in \mathfrak{F}(z_0)$  alors: ou bien  $d(\lambda|_{\theta_0 + \mathfrak{K}}) \neq 0$  en  $\theta_0$ , où bien

$\text{Hess}(\lambda|_{\theta_0 + \mathfrak{K}})$  est défini (positif ou négatif).

Autrement dit, si un translaté de  $\mathfrak{K}$  coupe  $\mathfrak{F}(z_0)$  en un point, alors soit on

a une intersection transversale, soit le point d'intersection est isolé et on a un contact d'ordre deux exactement entre le translaté et  $\mathcal{F}(z_0)$ .

La dernière hypothèse est:

(H4) Pour tout  $\theta_0 \in \mathbb{R}^{3*}$  et toute composante,  $K$  de  $\mathcal{F}(z_0)$ , l'ensemble  $(\theta_0 + \mathcal{H}) \cap K$  est compact.

On en déduit que toute composante de  $(\theta_0 + \mathcal{H}) \cap \mathcal{F}(z_0)$  est soit un point, soit une courbe analytique fermée. De plus, la distance entre différentes composantes de  $(\theta_0 + \mathcal{H}) \cap \mathcal{F}(z_0)$  est minorée par un  $\varepsilon_0 > 0$ , qui ne dépend pas de  $\theta_0$ .

Utilisant seulement (H1), (H2), on montre qu'il existe des composantes,  $K_1, \dots, K_M$  de  $\mathcal{F}(z_0)$  (avec  $M < +\infty$ ) telles que  $(K_j + \Gamma^*) \cap K_k \neq \emptyset$  si  $j \neq k$ , et

$\mathcal{F}(z_0) = \bigcup_{j=1}^M \bigcup_{\gamma \in \Gamma^*} (K_j + \gamma)$ . Soit  $J(K_j) = \{\gamma \in \Gamma^*; K_j + \gamma = K_j\}$ . On montre

(en utilisant toutes les hypothèses) que, si  $e_0 \in \mathbb{R}^{3*} \setminus \mathcal{H}$ , alors si  $K_j$  est compact on a  $J(K_j) = \{0\}$ , et si  $K_j$  est non-compact, on a  $J(K_j) = \mathbb{Z}g_j$ , où  $g_j = t_j e_0 + h_j \in \Gamma$ , avec  $t_j > 0$  et  $h_j \in \mathcal{H}$ . Dans le cas compact, on pose  $E_j = \mathbb{R}^{3*}$  et dans le cas non-compact on pose  $E_j = \{te_0 + h; h \in \mathcal{H}, 0 \leq t < t_j\}$ . Ainsi dans tous les cas,  $E_j$  est un domaine fondamental de  $J(K_j)$ . Soit  $\Omega_j = \hat{\Omega}_j \cap E_j$ , où  $\hat{\Omega}_j = \{x \in \mathbb{R}^{3*}; \text{dist}(x, K_j) = \text{dist}(x, \mathcal{F}(z_0))\}$ . Avec  $\Omega^* = \bigcup_1^M \Omega_j$ , on montre alors que  $(\Omega^* + \gamma) \cap \Omega^*$  est de mesure 0 pour tout  $\gamma \in \Gamma^* \setminus \{0\}$  et que

$$\bigcup_{\Gamma^*} (\Omega^* + \gamma) = \mathbb{R}^3.$$

Dans la formule (22), on prend  $\chi = (1_{\Omega^*}) * \rho$ , où  $\rho = \rho''(x'', \xi'') \otimes \delta(t)$ , où  $\rho'' \in C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$  est à support dans un petit voisinage de 0 et d'intégrale 1. On peut aussi décomposer  $\chi$  en  $\sum \chi_j$ , avec  $\chi_j = (1_{\Omega_j}) * \rho$ .

Pour  $z \in \mathbb{R}$  voisin de  $z_0$ , soit  $f_j(z, t)$  l'aire du domaine borné dans  $te_0 + \mathcal{H}$ , dont le bord est  $(te_0 + \mathcal{H}) \cap (\mathcal{F}(z) \cap \Omega_j)$ , ceci pour  $t$  dans l'intervalle des valeurs telles que cette intersection soit non-vide. (Dans le cas où  $K_j$  est non-compact,  $f_j$  peut s'étendre en une fonction périodique par rapport à  $t$ , et dans le cas compact on a aussi une extension  $C^\infty$  à  $\mathbb{R}_t$  qui est non-unique.) On suppose:

(H5) Les points critiques de  $t \mapsto f_j(z_0, t)$  sont non-dégénérés.

On arrive alors au résultat suivant:

*Théorème 5.* Soit  $n=3$  et fixons  $B \neq 0$ . On suppose (H1)–(H5). Il existe alors  $\varepsilon_0 > 0$  et  $b(\cdot, h) \in L^1(|z_0 - \varepsilon_0, z_0 + \varepsilon_0|)$  tels que pour tout

$F \in C_0^\infty(|z_0 - \varepsilon_0, z_0 + \varepsilon_0|)$  dépendant aussi de  $h > 0$ , mais vérifiant:

$$(24) \quad F, F', F'' = \mathcal{O}(h^{-N_0}),$$

pour un  $N_0 > 0$  arbitraire mais fixé, on ait:

$$(25) \quad \tilde{r} F(P_h B, \nu) = \frac{\int F(z) b(z, h) dz}{\pi \text{Vol}(\mathbb{R}^3/\Gamma) \text{Vol}_{B^*} \wedge dt(\mathbb{R}^3/\Gamma^*)} + \mathcal{O}(h^\infty), \quad h \rightarrow 0.$$

Ici,  $B^*$  est la forme duale de  $B$ , bien définie sur  $\mathfrak{K}$ . On peut aussi décrire  $b$  de la manière suivante: Pour chaque  $j=1, \dots, M$ , soient  $T_{j,k}$ ,  $1 \leq k \leq m(j)$  les point critiques de  $t \mapsto f_j(z_0, t)$ . Alors,

$$(26) \quad b(z) = b_0(z) + \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^{m(j)} b_{j,k}(z),$$

où  $\partial_z^\nu b_0(z) = \mathcal{O}(1)$ ,  $h \rightarrow 0$ , pour tout  $\nu = 0, 1, 2, \dots$ .  $b_{j,k}$  est une contribution d'un voisinage de  $T_{j,k}$ . Pour la décrire, on fixe  $j, k$  et on supprime  $j, k$  des notations la plupart du temps. On a alors un symbole classique d'ordre 0:  $f(t, z; h)$  avec  $f(t, z; 0) = f_j(t, z)$ . Soit  $(\tau(\nu h; h), \zeta(\nu h; h))$  la solution près de  $(T, z_0)$  du système:

$$(27) \quad \partial_t f(\tau, \zeta; h) = 0, \quad f(\tau, \zeta; h) = \nu h,$$

pour  $\nu \in \mathbb{N}$  et  $\nu h$  proche de  $f_j(T, z_0)$ . Alors  $\tau(s; h)$ ,  $\zeta(s; h)$  sont des symboles classiques d'ordre 0, avec  $\partial_s \zeta$  elliptique, et il existe un symbole classique,  $m(z, s; h) > 0$  d'ordre 0, tel que

$$(28) \quad b_{j,k}(z; h) = \sum_{|\nu h - f(T, z_0; 0)| < \delta_0} h m(z, \nu h; h) H(\pm(z - \zeta(\nu h; h))) |z - \zeta(\nu h; h)|^{-\frac{1}{2}},$$

où  $\delta_0$  est petit. De plus:

$$(29) \quad m(\zeta(\nu h; h), \nu h; h) = \left| 2 \frac{\partial_z f}{\partial \zeta^2 f}(\tau(\nu h; h), \zeta(\nu h; h); h) \right|^{\frac{1}{2}}.$$

Le signe,  $\pm$  dans (28) est celui de  $\partial \zeta^2 f / \partial z f$ .

### References

[AsM] *N.W. Aschcroft, N.D. Mermin*, Solid state physics, Holt, Rinehart and Winston, New York–London(1976).

- [AvSi] *J. Avron, B. Simon*, Stability of gaps for periodic potentials under variation of a magnetic field, *J. Phys. A: Math. Gen.* 18 (1985), 2199–2205.
- [BoGH] *L. Boutet de Monvel, A. Grigis, B. Helffer*, Parametrixes d'opérateurs pseudo-différentiels à caractéristiques multiples, *Astérisque*, 34–35, 93–121.
- [Be] *R. Beals*, Characterization of P.D.O. and applications, *Duke Math. J.*, 44(1977), 45–57.
- [B1] *J. Bellissard*, Almost periodicity in solid state physics and  $C^*$ -algebras. Harald Bohr centenary conference on almost periodic functions, April 25, 1987.
- [B2] *J. Bellissard*,  $C^*$ -algebras in solid state physics, 2D-electrons in a uniform magnetic field, Warwick conference on operator algebras, July 1987.
- [GuRT] *J.C. Guillot, J. Ralston, E. Trubowitz*, Semiclassical methods in solid state physics, *Comm. Math. Physics*, 116(1988), 401–415
- [HS1] *B. Helffer, J. Sjöstrand*, Equation de Schrödinger avec champs magnétique et équation de Harper, Préprint(1988).
- [HS2] *B. Helffer, J. Sjöstrand*, En préparation.
- [Hö] *L. Hörmander*, The analysis of linear partial differential operators III, *Grundlehren der Math. Wiss.*, Springer, 274(1985).
- [L] *J.M. Luttinger*, The effect of a magnetic field on electrons in a periodic potential, *Phys. Rev.* 84, n<sup>o</sup>4(1951), 814–817.
- [N1] *G. Nenciu*, Existence of exponentially localized Wannier functions, *Comm. Math. Phys.*, 91(1983), 81–85.
- [N2] *G. Nenciu*, Stability of energy gaps under variation of the magnetic field, *Letters in Mathematical Physics*, 11(1986), 127–132.
- [N3] *G. Nenciu*, Bloch electrons in a magnetic field: rigorous justification of the Peierls–Onsager effective Hamiltonian, preprint, (April 1988).
- [O] *L. Onsager*, Interpretation of the de Haas–van Alphen effect, *Phil. Mag.*, 43(1952), 1006–1008.
- [P] *R. Peierls*, Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen, *Z. für Physik* 80(1933), 763–791.
- [Sh] *Shubin*, The density of states of selfadjoint elliptic operators with almost periodic coefficients. *Trudy Sem. Petrovsk.* n<sup>o</sup>3(1978), 243–275.
- [Z] *J. Zak*, Magnetic translation group, *Physical Review*, Vol.134, n<sup>o</sup>6A, June 1964.